Profesor
Elison Cortez

PITAGORAS
ACADEMIA

QUÍMICA

GRUPO PITÁGORAS

ENLACE QUÍMICO

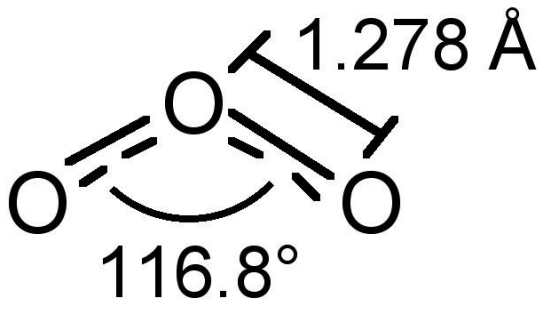
GEOMETRÍA MOLECULAR

POLARIDAD DE MOLÉCULAS

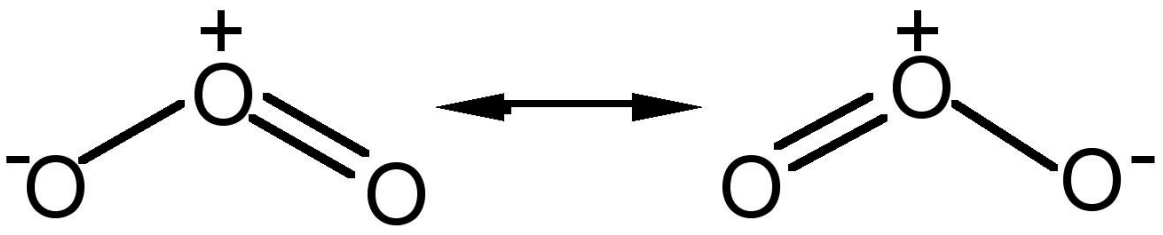
RESONANCIA

Existen moléculas cuyas propiedades no pueden explicarse con una sola estructura de Lewis, sino que son necesarias dos o más. La estructura real sería entonces un promedio de estas estructuras o formas resonantes.

La resonancia muestra la expansión de la nube electrónica de enlace a más de dos átomos. Por ejemplo, el ozono experimentalmente muestra 2 enlaces O-O de igual longitud, lo cual no puede ser explicado considerando una sola estructura de Lewis:



(a)



(b)

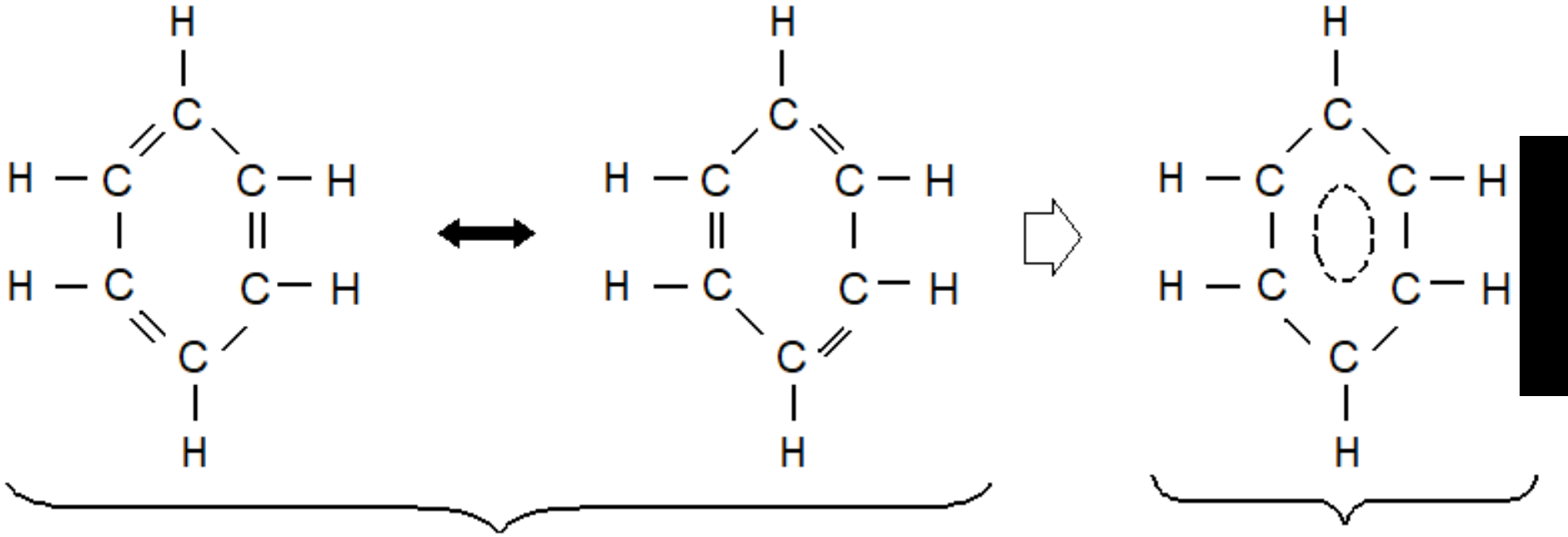
HÍBRIDO DE RESONANCIA

(REAL REPRESENTACIÓN DE LA MOLÉCULA)

2 ESTRUCTURAS RESONANTES

RESONANCIA

Para el benceno (C_6H_6)

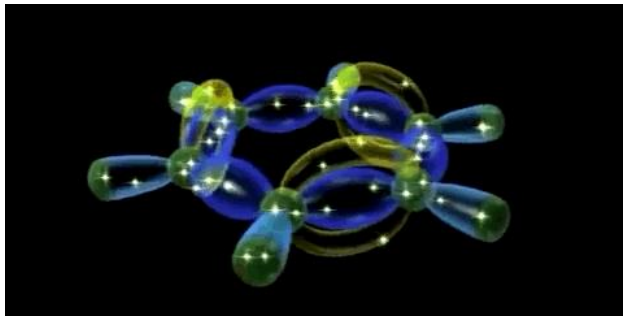


2 estructuras resonantes

(Estructuras ideales)

Híbrido de resonancia

(Estructura real)



RESONANCIA

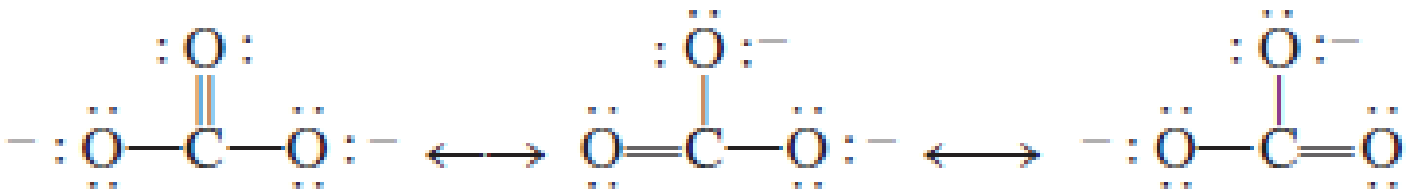
OBSERVACIONES:

1°) La “resonancia” es una invención humana, diseñada para indicar las limitaciones de los sencillos modelos de enlace (diagramas de Lewis).

2°) El efecto resonante es máximo en moléculas planares.

3°) Ninguna de las formas resonantes existe ya que se ha comprobado experimentalmente que el enlace entre los átomos donde puede estar los electrones π “deslocalizados” tiene igual energía de enlace e igual longitud de enlace, por lo tanto se dice que solo existe el híbrido de resonancia.

El ion carbonato proporciona otro ejemplo de resonancia:



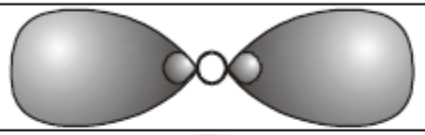
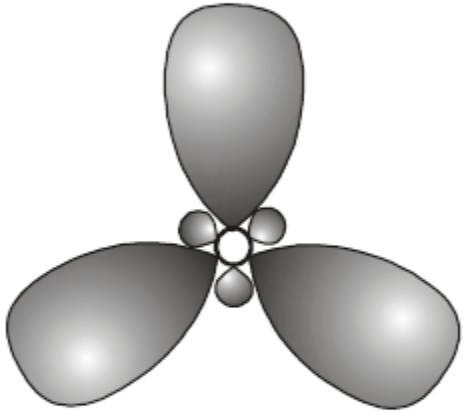
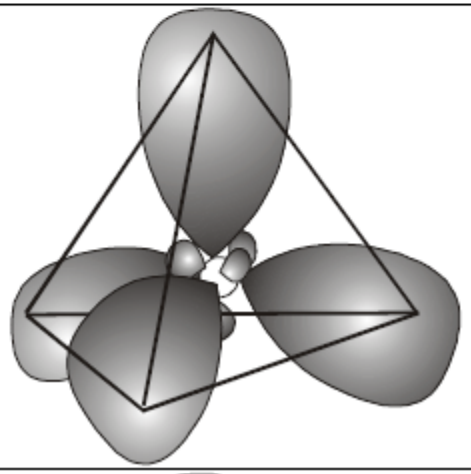
De acuerdo con la evidencia experimental, todos los enlaces carbono-oxígeno en el CO_3^{2-} son equivalentes. Por tanto, las propiedades del ion carbonato se explican mejor tomando sus estructuras de resonancia en forma conjunta.

HIBRIDIZACIÓN O HIBRIDACIÓN

La hibridación es la combinación que un átomo hace de sus orbitales para formar igual número de nuevos orbitales equivalentes denominados orbitales híbridos, que permiten al átomo formar una mayor cantidad de enlaces a fin de llenar en lo posible su capa de valencia de acuerdo a las observaciones experimentales. Existen diversas formas en las cuales un átomo puede combinar sus orbitales. Se analizarán a continuación aquellas que ocurren únicamente entre orbitales *s* y orbitales *p*.

Orbitales atómicos puros (iniciales)	Orbitales atómicos híbridos
1. Se mezclan "n" orbitales. 2. Son diferentes entre sí. 3. Tienen diferente orientación espacial. 4. Generalmente no concuerda con la geometría molecular	1. Se obtienen "n" orbitales. 2. Son todos equivalentes. 3. Su distribución es simétrica. 4. Explica la geometría molecular.

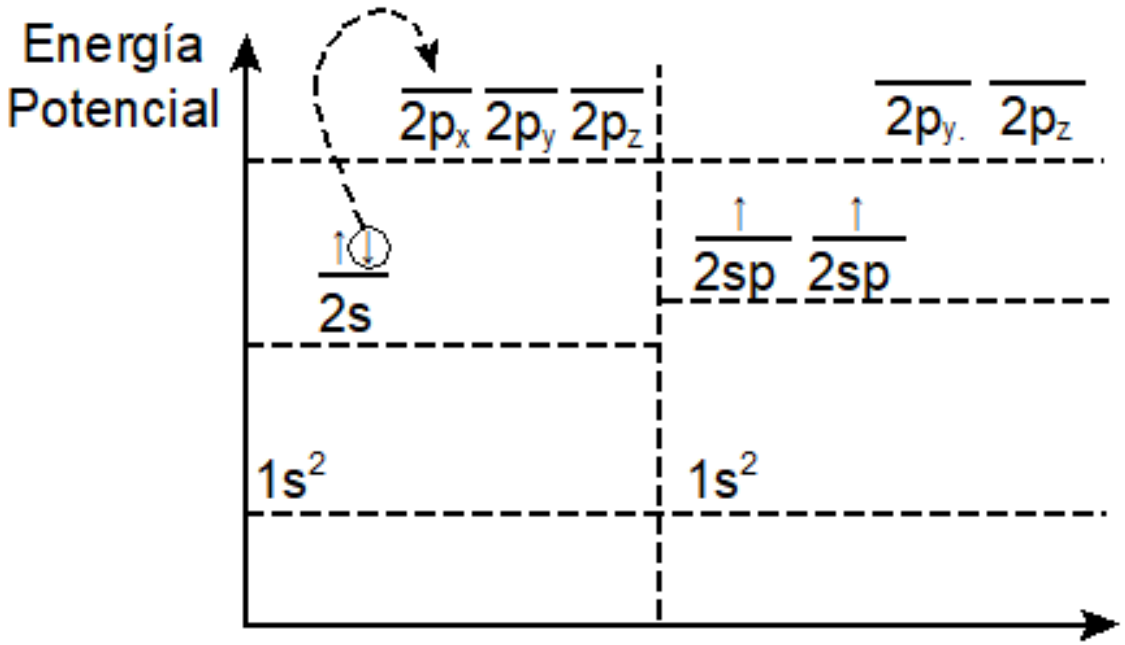
TIPOS DE HIBRIDACIÓN

Tipo	Orbitales implicados	Geometría	Orbitales híbridos	Ángulos (suponiendo todos los enlaces iguales)	Ejemplos
sp	1 orb s + 1 orb p	Lineal (digonal)		180º	$BeCl_2$, CO, CO_2
sp^2	1 orb s + 2 orb p	Triangular (trigonal)		120º	BF_3, HCHO
sp^3	1 orb s + 3 orb p	Tetraédrica (tetragonal)		109,5º	H_2O, NH_3, CH_4, CCl_4.

HIBRIDACIÓN

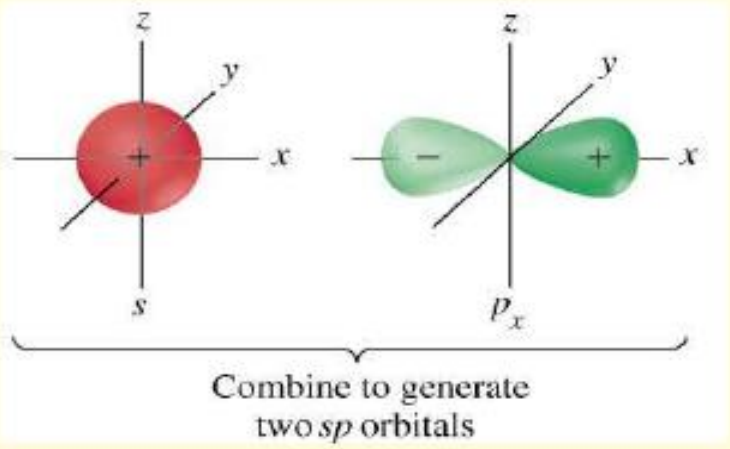
Ejemplos de aplicación:

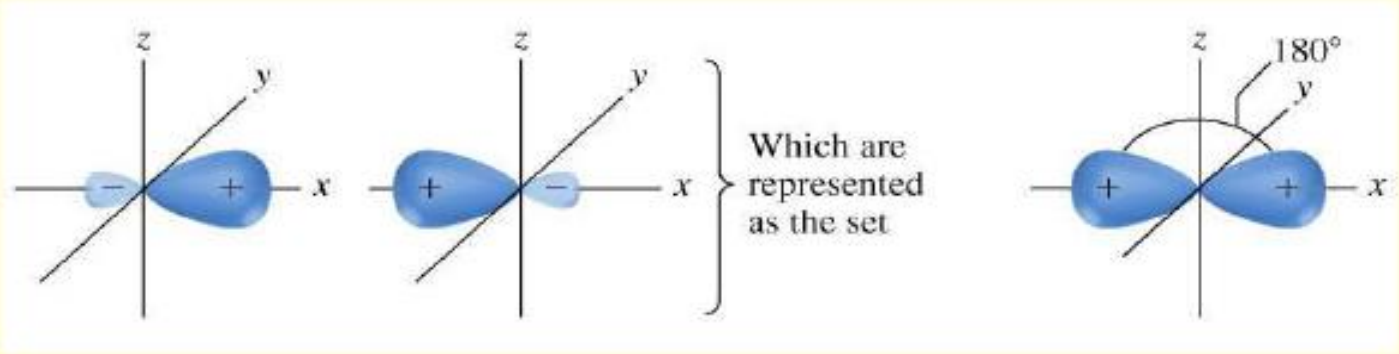
a. Hibridización (sp) para el berilio: $_4Be$: $1s^2\ 2s^2$ (estado basal)



En la capa de valencia del átomo de Be, un electrón del subnivel "s" se promueve a un orbital 2p más energético, pasando a un estado excitado; en ésta condición se produce la combinación entre el orbital "s" y el orbital "p", formandose dos "orbitales híbridos" (sp).

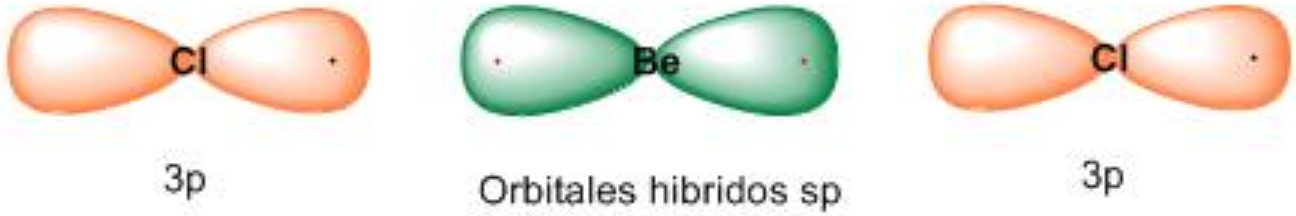
HIBRIDACIÓN





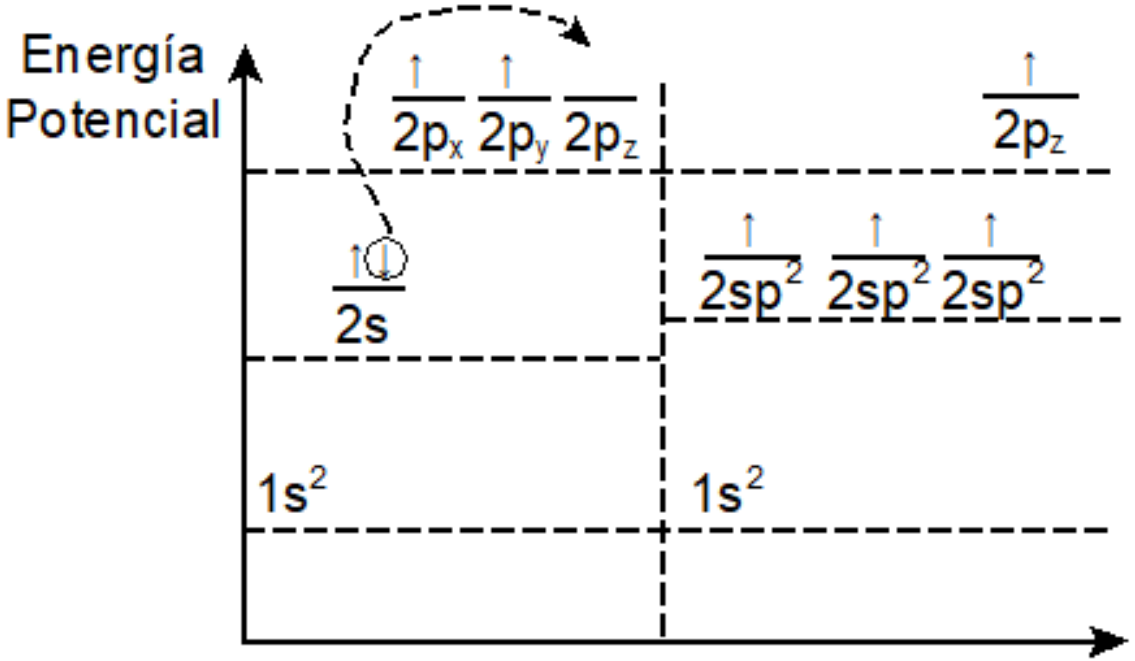
Formación de enlaces

Ejemplo: Cloruro de berilio ($BeCl_2$)



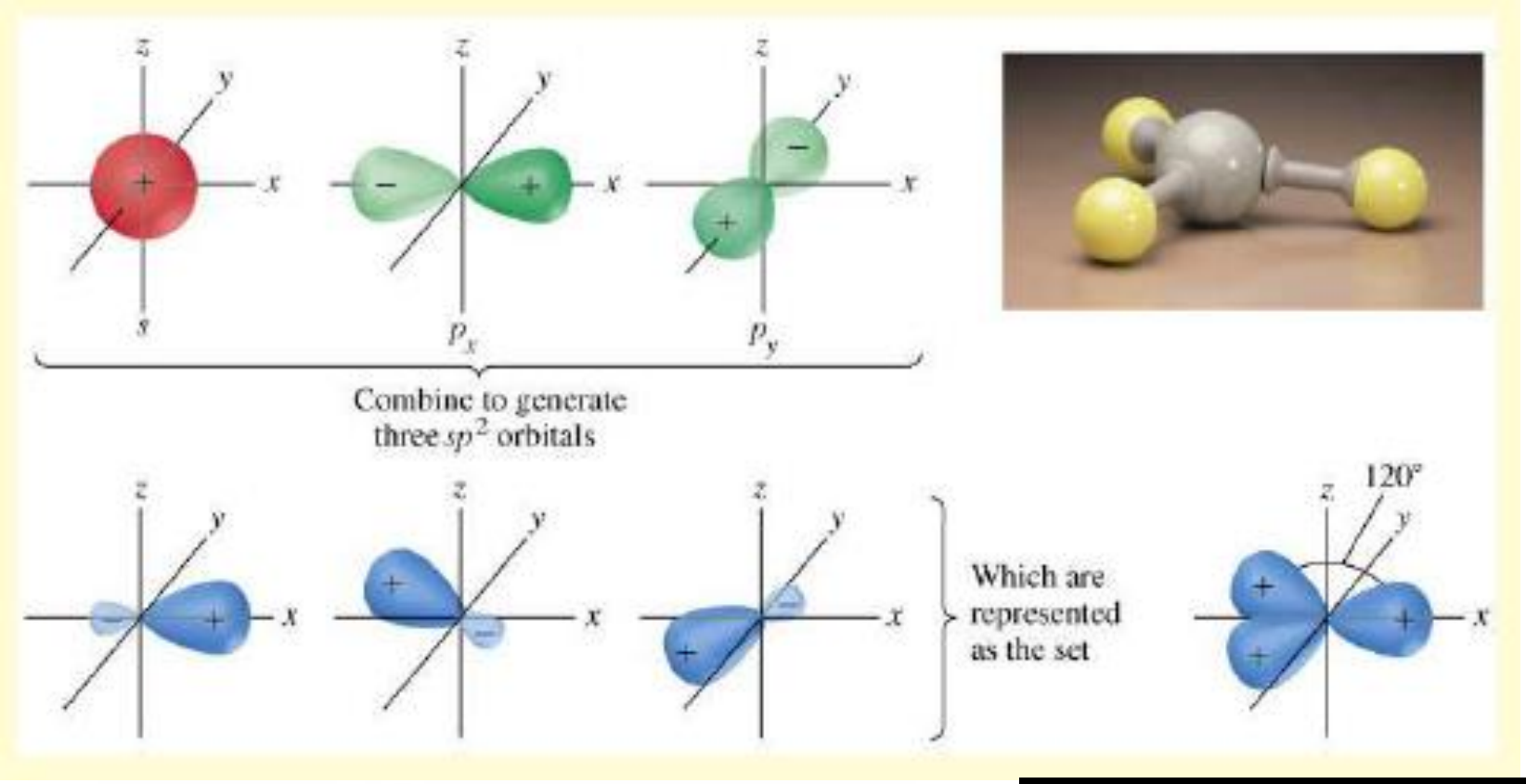
HIBRIDACIÓN

b. Hibridización (sp^2) para el carbono: $_6C$: $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ (estado basal)

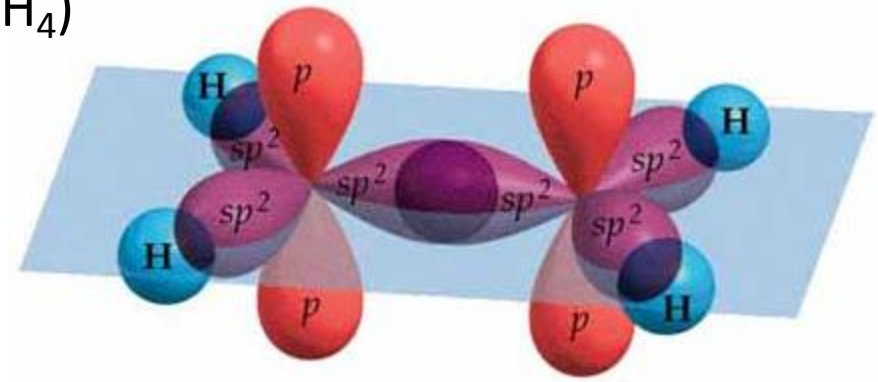


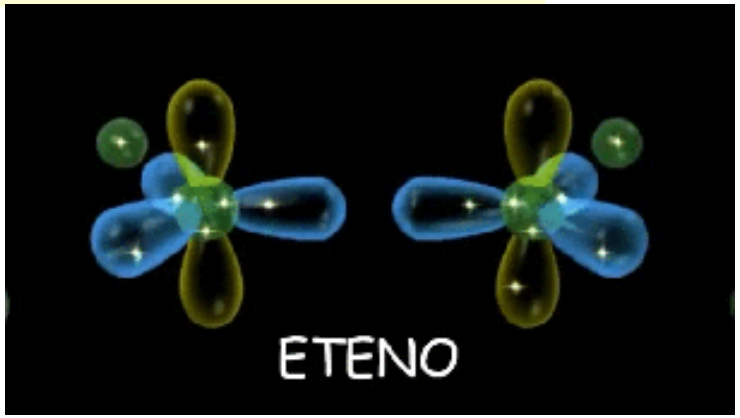
En la capa de valencia del átomo de carbono, un electrón del subnivel "s" se promueve a un orbital 2p más energético, pasando a un estado excitado; en ésta condición se produce la combinación entre el orbital "s" y dos orbitales "p", formandose tres "orbitales híbridos" (sp^2).

HIBRIDACIÓN



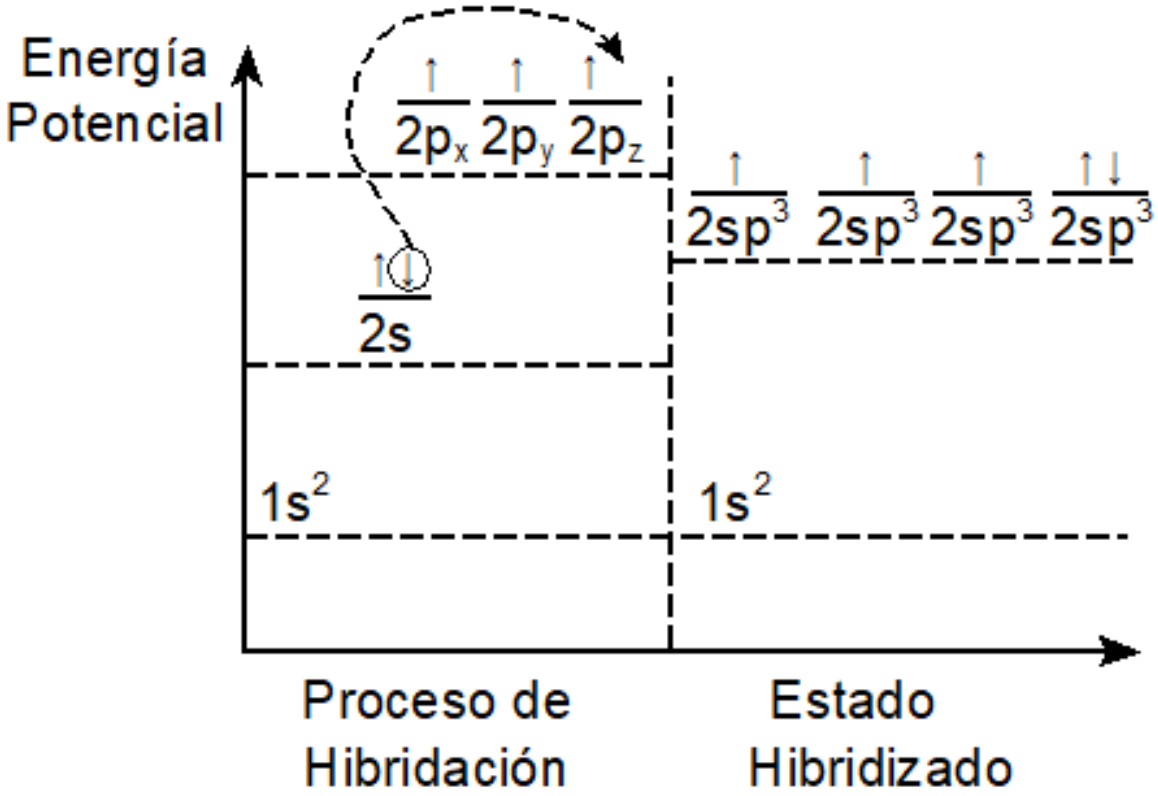
Ejemplo: Eteno (C_2H_4)





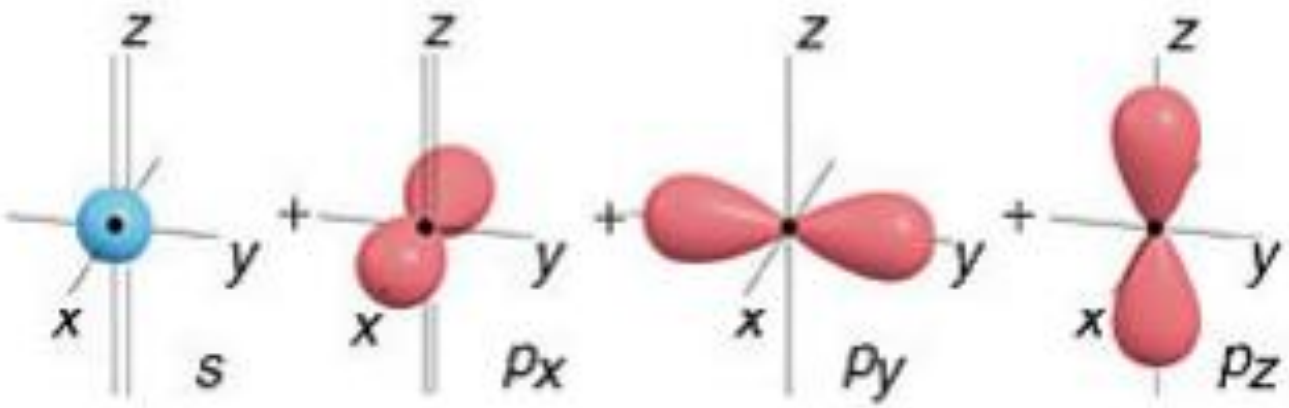
HIBRIDACIÓN

c. Hibridización (sp^3) para el nitrógeno: $_7N$: $1s^2 2s^2 2p^3$ (estado basal)

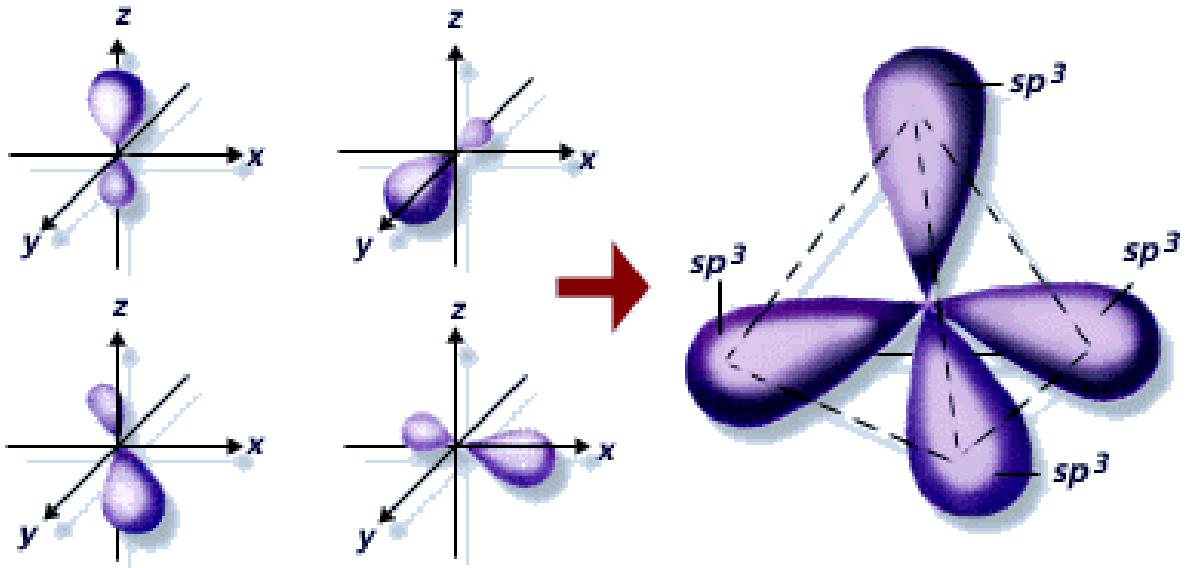


En la capa de valencia del átomo de nitrógeno, un electrón del subnivel "s" se promueve a un orbital 2p más energético, pasando a un estado excitado; en ésta condición se produce la combinación entre el orbital "s" y los tres orbitales "p", formandose cuatro "orbitales híbridos" (sp^3).

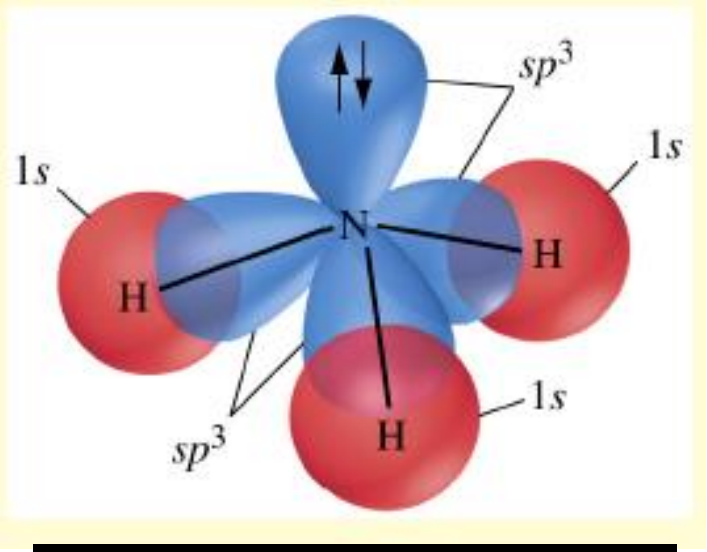
HIBRIDACIÓN

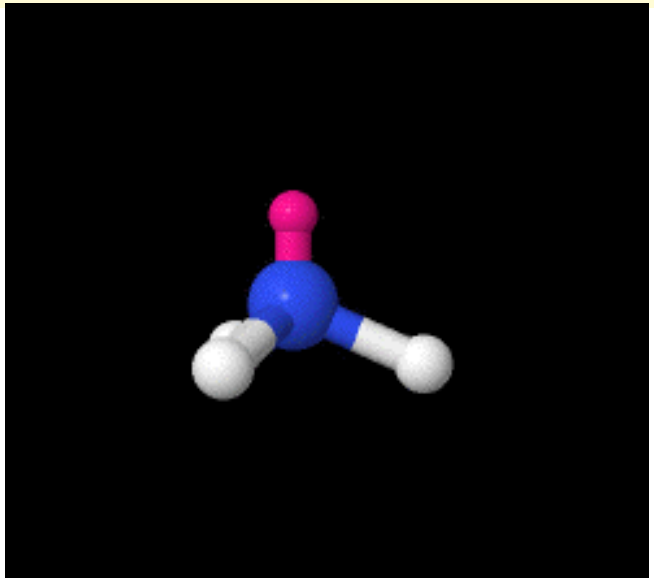


Hibridación para formar 4 orbitales híbridos sp3



Ejemplo: Amoniaco (NH_3)





HIBRIDACIÓN

OBSERVACIONES:

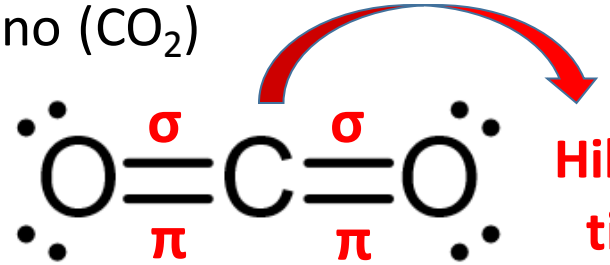
1. Los electrones ubicados en orbitales híbridos, forman enlaces tipo “sigma”.

2. Los electrones no enlazantes (electrones libres), se ubican en orbitales híbridos.

3. Los enlaces tipo “π”, se forman con electrones ubicados en orbitales “p” puros no hibridizados.

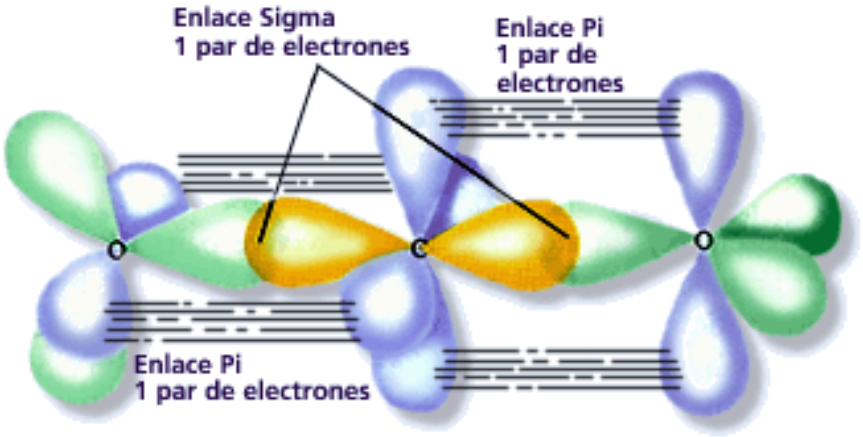
Ejemplo 1: Dióxido de carbono (CO_2)

Sea el Diagrama de Lewis:



Hibridación tipo “sp”

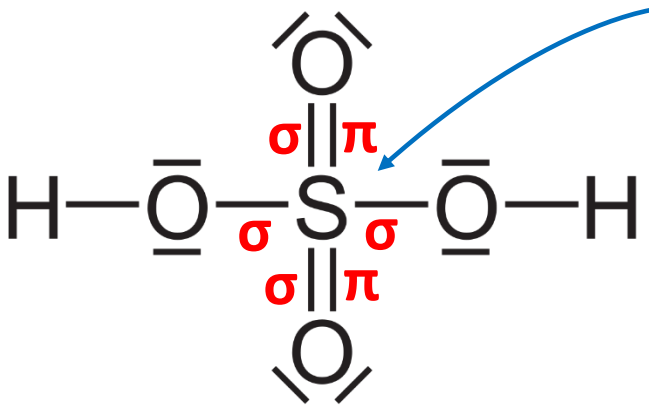
El átomo central presenta 2 enlaces “sigma” (σ)



HIBRIDACIÓN

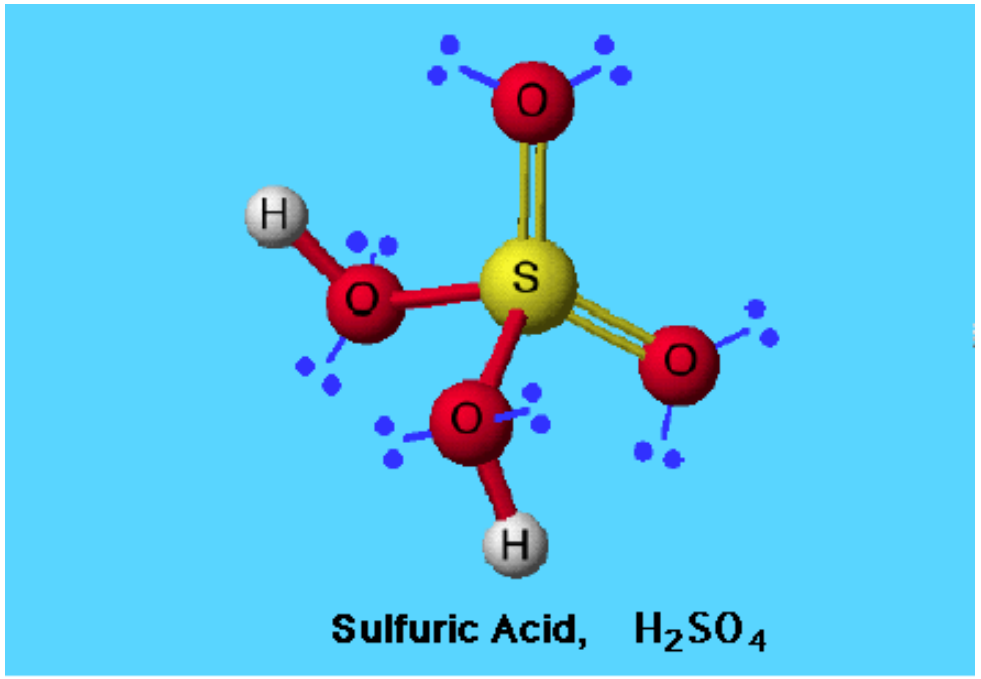
Ejemplo 2: Ácido Sulfúrico (H_2SO_4)

Sea el Diagrama de Lewis:



Hibridación tipo "sp^3"

El átomo central presenta 4 enlaces "sigma" (σ)



GEOMETRÍA ELECTRÓNICA Y MOLECULAR

El conocimiento del tipo de hibridización que presenta el átomo central de una molécula, nos permite predecir la distribución espacial de cada uno de los orbitales que contienen los pares de electrones enlazantes (P.E.E.) y los pares de electrones libres (P.E.L.). La representación gráfica de la distribución de todos los pares de electrones que rodean a un átomo enlazado se conoce como la **Geometría Electrónica** de una molécula.

Sin embargo la real distribución espacial de todos los átomos (es decir núcleos) que constituyen una molécula, está dada por la denominada **Geometría Molecular**. La geometría de una molécula influye en sus propiedades físicas y químicas, como el punto de fusión, el punto de ebullición, la densidad y el tipo de reacciones en que puede participar.

Los orbitales que contienen pares no enlazantes o pares solitarios ocupan mayor espacio y poseen mayor energía que los orbitales que contienen pares electrónicos enlazantes. Esto se explica porque un par no compartido (par solitario) está bajo la influencia de un solo núcleo (el del átomo central), mientras que un par compartido (par enlazante) está influenciado por dos núcleos y además al formarse el enlace han perdido energía.

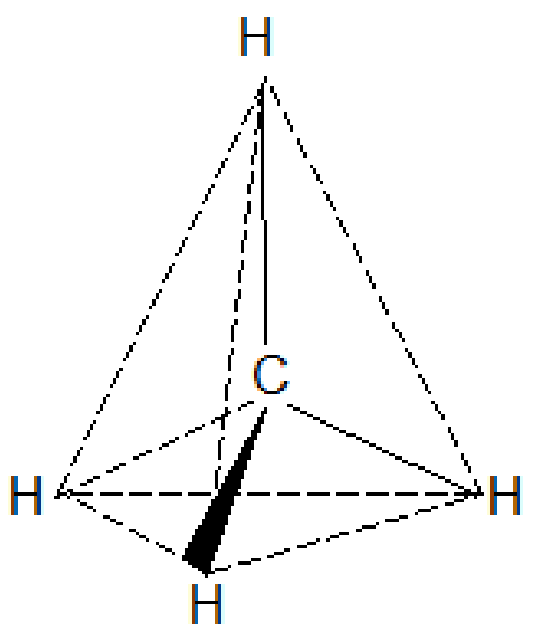
Según esto, podemos afirmar que la geometría molecular está determinada por tres tipos de repulsión electrónica:

GEOMETRÍA ELECTRÓNICA Y MOLECULAR

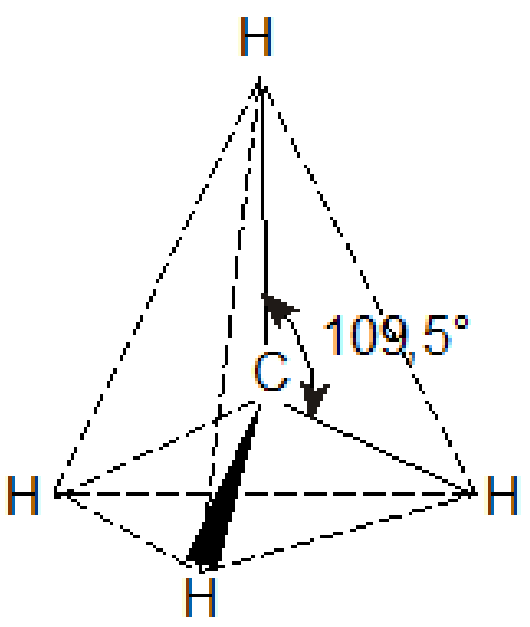
TEORÍA DE LA REPULSIÓN DE LOS PARES DE ELECTRONES DE VALENCIA

par solitario - par solitario > par solitario - par enlazante > par enlazante - par enlazante

Ejemplo 1 : Para el metano (CH_4)



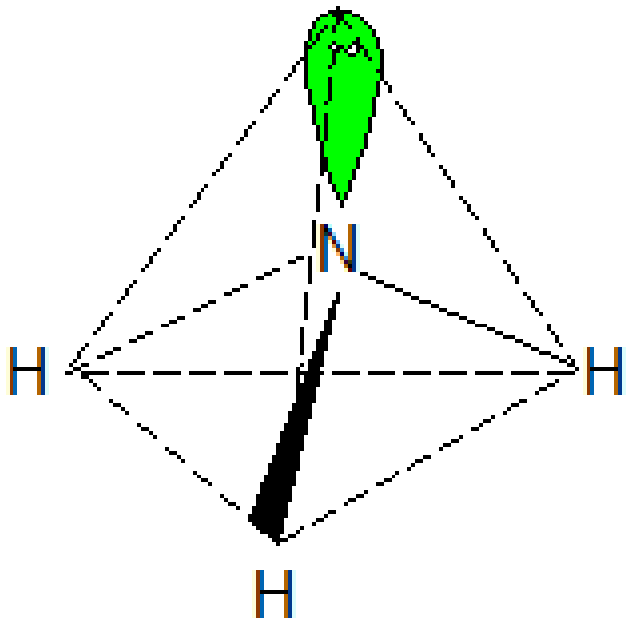
Geometria Electrónica Tetraédrica



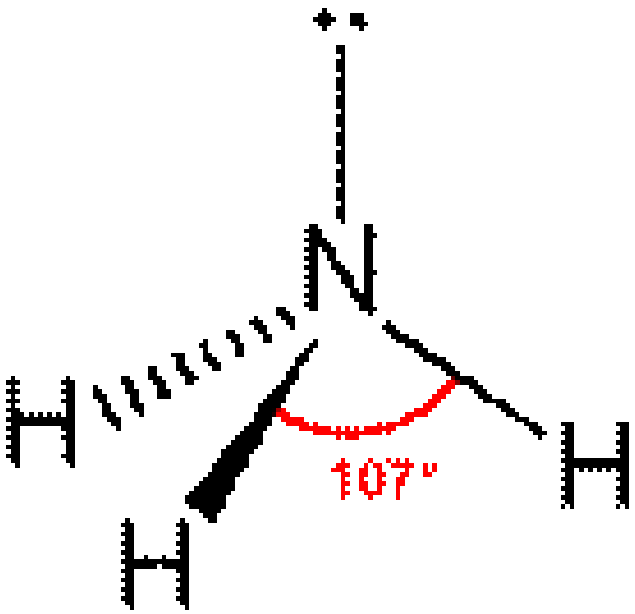
Geometria Molecular Tetraédrica

GEOMETRÍA ELECTRÓNICA Y MOLECULAR

Ejemplo 2: Para el amoniaco (NH_3)



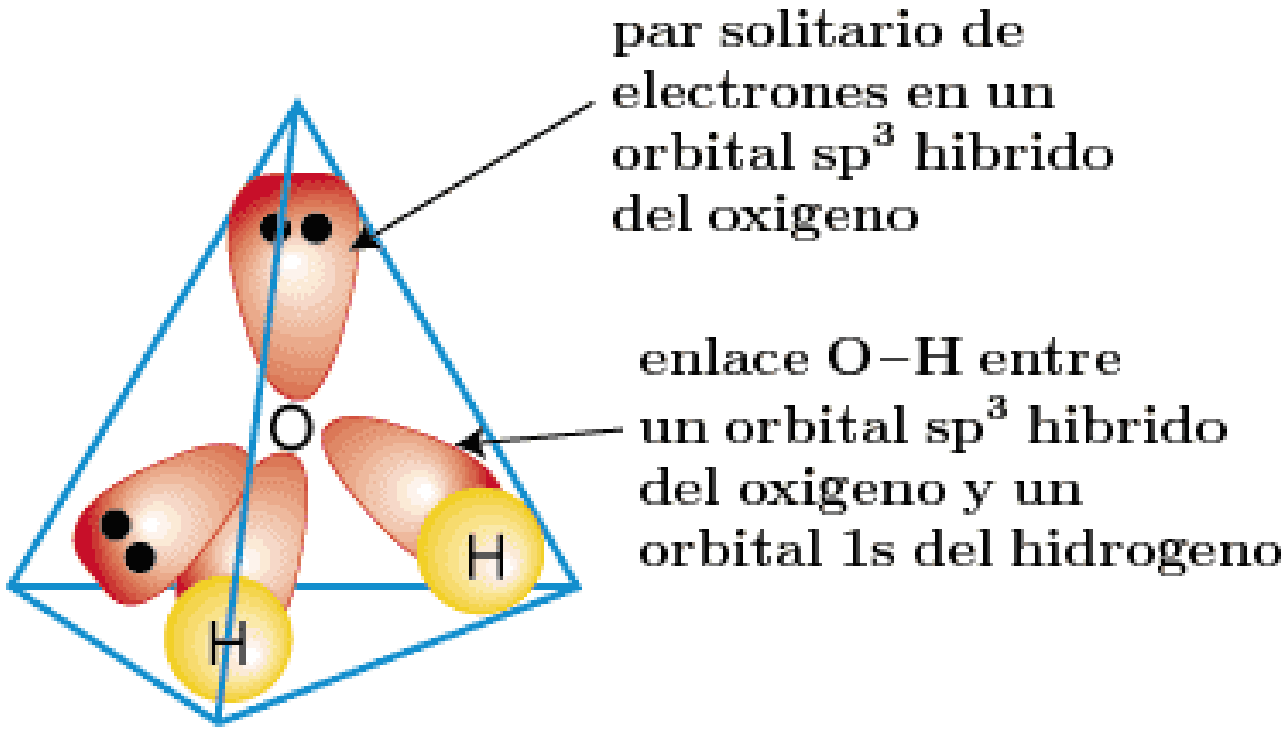
Geometría Electrónica Tetraédrica



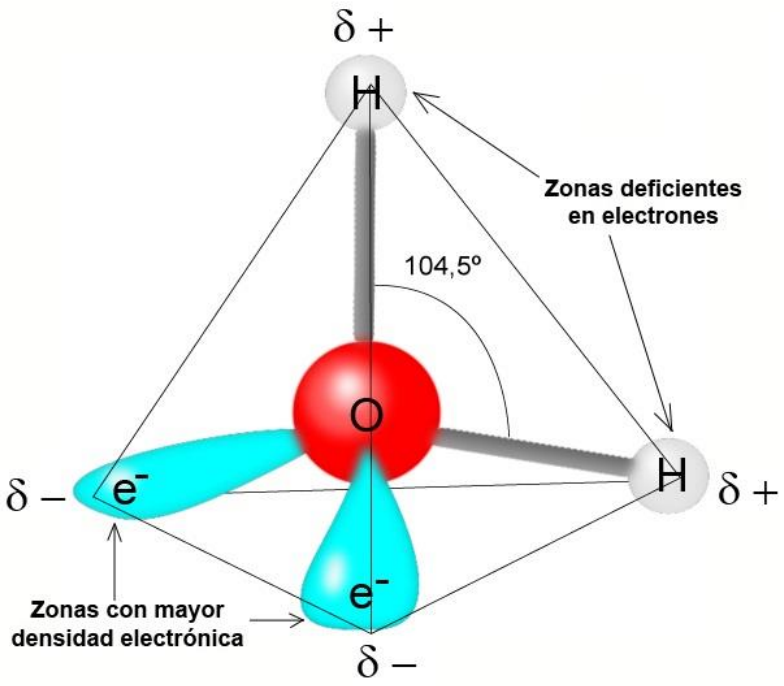
Geometría Molecular Piramidal

GEOMETRÍA ELECTRÓNICA Y MOLECULAR

Ejemplo 3: Para el agua(H_2O)



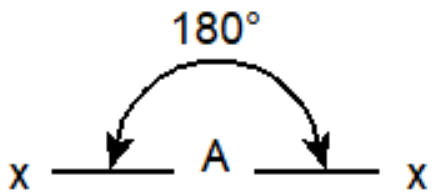
Geometría Electrónica Tetraédrica



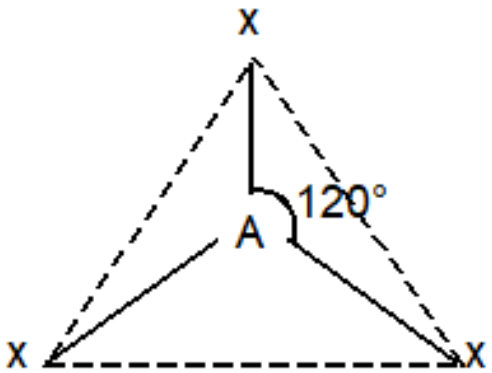
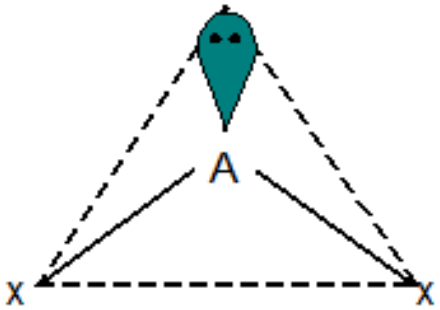
Geometría Molecular Angular

GEOMETRÍA ELECTRÓNICA Y MOLECULAR

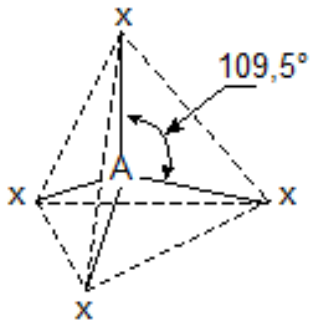
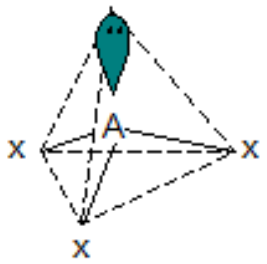
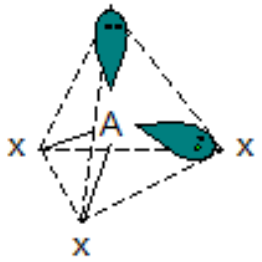
En general, la geometría de una molécula está determinada por su longitud de enlace y el ángulo de enlace; éstos se deben determinar de manera experimental. Sin embargo, hay un procedimiento sencillo que permite predecir la geometría de las moléculas o iones; está relacionada con el tipo de hibridización del átomo central y el número de electrones solitarios de dicho átomo, a partir de la estructura de Lewis.

Tipo de Hibridización	N°enlaces sigma	N° pares solitarios	Geometría Molecular	Ejemplo
sp	2	0	 Lineal	BeH_2

GEOMETRÍA ELECTRÓNICA Y MOLECULAR

sp^2	3	0	 Trigonal Planar	BF_3
	2	1	 Angular	SO_2

GEOMETRÍA ELECTRÓNICA Y MOLECULAR

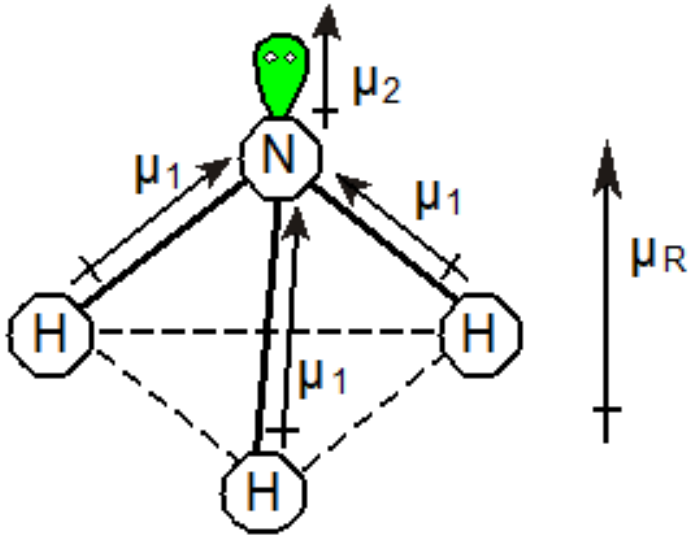
sp^3	4	0	 Tetraédrica	CH_4
	3	1	 Piramidal Triangular	NH_3
	2	2	 Angular	H_2O

POLARIDAD DE MOLÉCULAS

MOMENTO DIPOLAR DE UNA MOLÉCULA

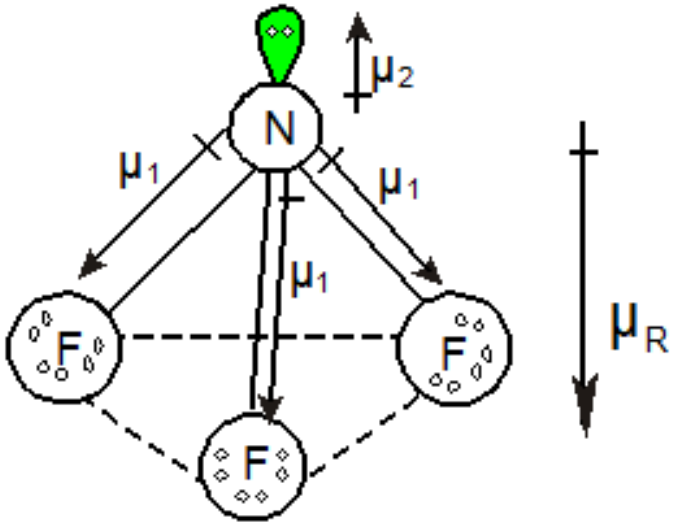
Es la resultante vectorial de los momentos dipolares que tiene una molécula. El sentido de orientación es hacia el extremo que tiene el mayor número de electrones libres.

Ejemplo 1: Molécula de amoniaco (NH_3)



$\overline{u}_R = 1{,}46\ D$

Ejemplo 2: Molécula de NF_3



$\overline{u}_R = 0{,}24\ D$

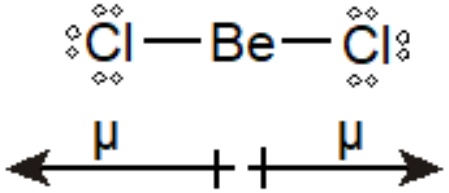
POLARIDAD DE MOLÉCULAS

POLARIDAD MOLECULAR

La forma de una molécula y la polaridad de sus enlaces determinan juntas la distribución de cargas en la molécula. Decimos que **una molécula es polar, cuando es asimétrica, es decir los centros de carga positiva y negativa no coinciden**. Un extremo de una molécula polar tiene una pequeña carga positiva y otro extremo una pequeña carga negativa. **Una molécula apolar es simétrica puesto que los centros de carga positiva y negativa coinciden.**

A. Molécula apolar o no polar : Es aquella molécula en donde al sumar vectorialmente todos sus momentos de enlace se obtiene un vector resultante nulo; es decir, es una molécula que presenta un momento dipolar resultante igual a cero ($_R = 0$).

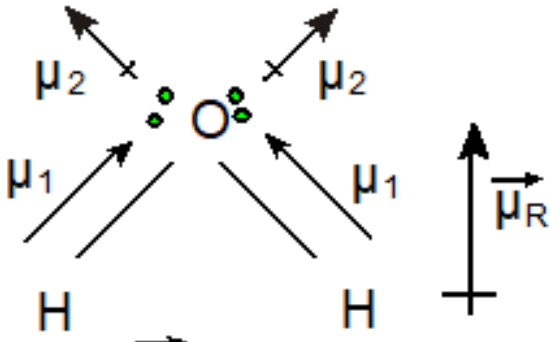
Ejemplo:

Molécula de Cloruro de Berilio ($BeCl_2$)	 $\bar{u}_R = 0$ Molécula Apolar	Como la molécula es lineal y los dipolos de enlace son de la misma magnitud pero opuestos, existe una distribución de cargas simétrica

POLARIDAD DE MOLÉCULAS

B. Molécula polar : Es aquella molécula en donde al sumar vectorialmente todos sus momentos de enlace se obtiene un vector resultante no nulo; es decir, es una molécula que presenta un momento dipolar resultante diferente de cero ($_R \neq 0$).

Ejemplo:

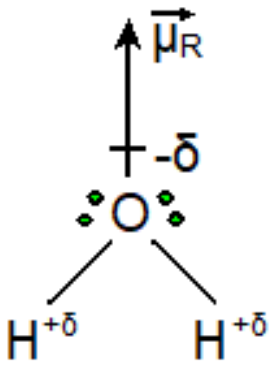
Molécula de Agua (H_2O)	 $\vec{\mu}_R \neq 1{,}87$ D (Diferente de cero) Molécula Polar	Como la molécula es angular, la distribución de las cargas no es simétrica.

POLARIDAD DE MOLÉCULAS

REGLAS PRÁCTICAS PARA DETERMINAR SI UNA MOLÉCULA ES APOLAR O POLAR

1. Toda molécula diatómica homonuclear es apolar. **Ejemplos :** Cl_2 ; O_2 ; N_2
2. Toda molécula diatómica heteronuclear es polar. **Ejemplos :** HCl ; CO ; NO
3. Para moléculas poliatómicas; cuando el átomo central tiene electrones sin compartir, la molécula es polar.

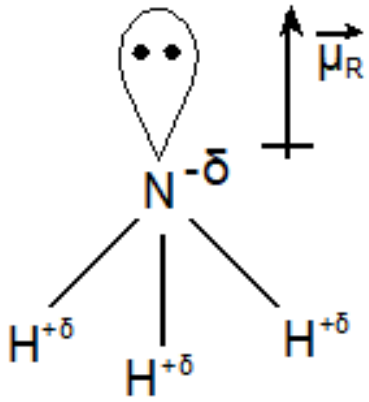
Ejemplo 1 : En el agua H_2O



Enlaces : Covalentes Polares

Molécula : Polar

Ejemplo 2 : En el amoniaco (NH_3)



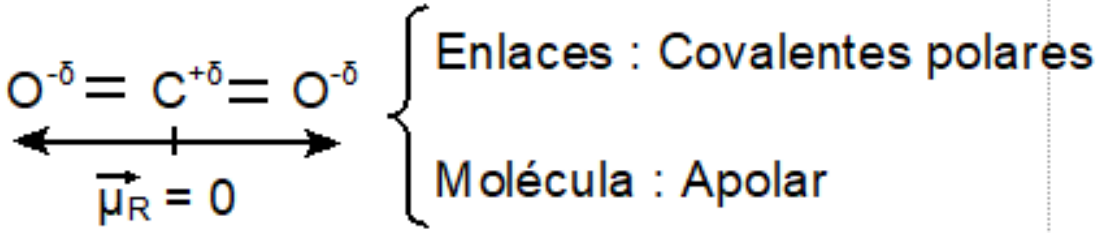
Enlaces : Covalentes polares

Molécula : Polar

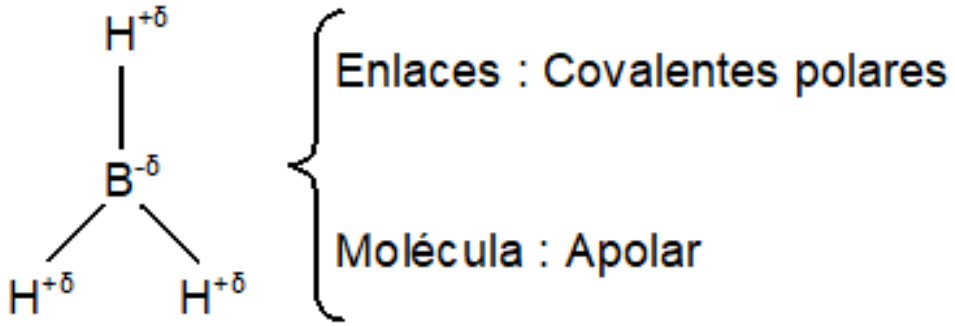
POLARIDAD DE MOLÉCULAS

4. Cuando el átomo central de la molécula tiene todos los electrones compartidos y los átomos que lo rodean son iguales, la molécula es apolar.

Ejemplo 1: En el gas carbónico (CO_2)



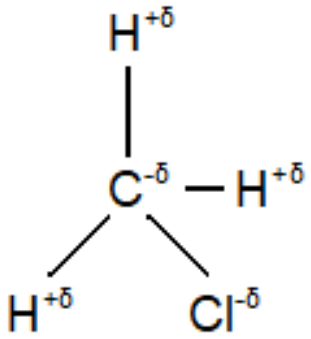
Ejemplo 2 : En el borano (BH_3)



5. Cuando el átomo central de la molécula tiene todos los electrones compartidos pero uno de los átomos que lo rodea es diferente a los demás, la molécula es polar.

POLARIDAD DE MOLÉCULAS

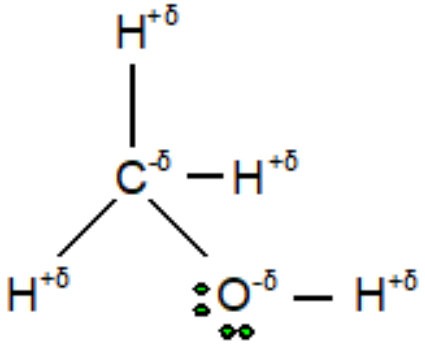
Ejemplo 1 : En el cloroformo (CH_3Cl)



Enlaces : Covalentes polares

Molécula : Polar

Ejemplo 2 : En el alcohol metílico (CH_3OH)



Enlaces : Covalentes polares

Molécula : Polar

Observaciones :

1°) A mayor momento dipolar resultante (μ_R) es mayor la polaridad de la molécula.

POLARIDAD H_2O ($\bar{u}_R = 1{,}87\,D$)	>	POLARIDAD NH_3 ($\bar{u}_R = 1{,}46\,D$)

POLARIDAD DE MOLÉCULAS

2°) **Criterio de solubilidad :** Las sustancias de polaridad semejante se disuelven entre sí. Los solventes polares disuelven a sustancias también polares (e iónicos) y los solventes no polares disuelven a sustancias no polares.

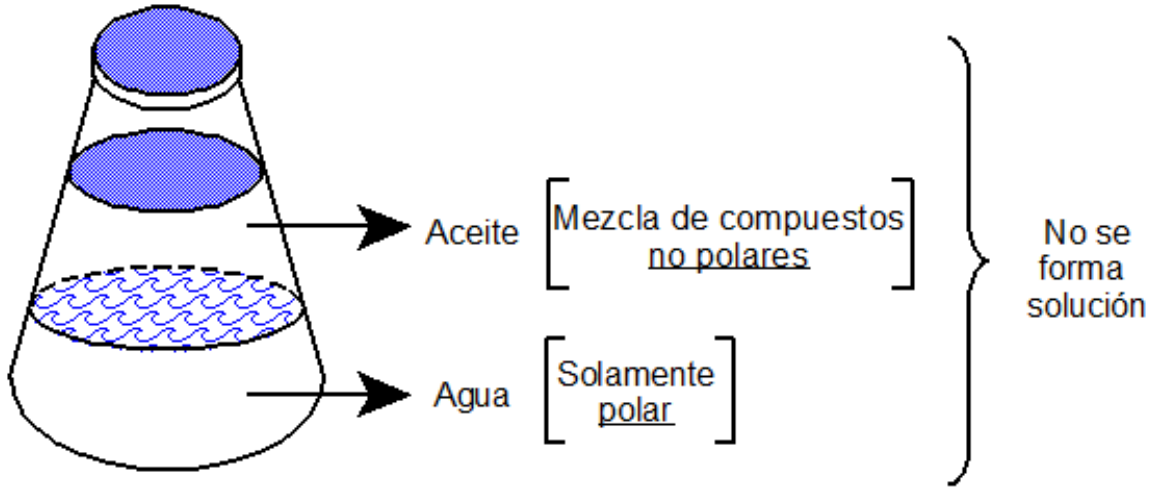
"LO SEMEJANTE DISUELVE A LO SEMEJANTE"

* **Solventes polares :** Agua (H_2O) ; Etanol (C_2H_5OH) ; etc.

* **Solventes apolares :** Tetracloruro de carbono (CCl_4) ; Benceno (C_6H_6)

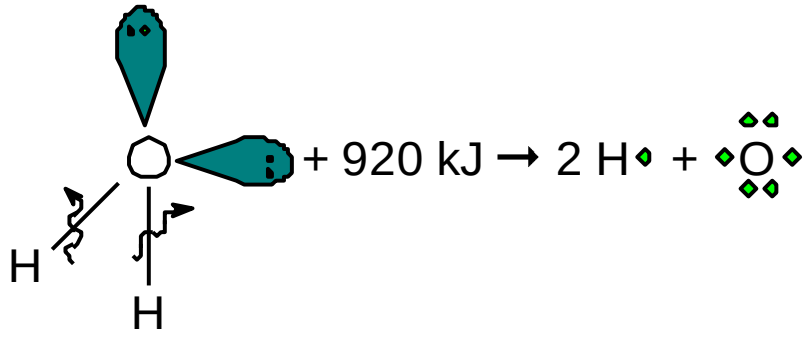
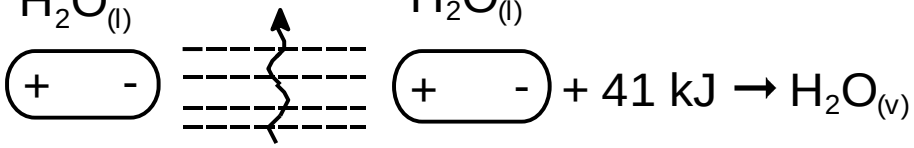
4°) Todos los hidrocarburos (compuestos que tienen únicamente carbono e hidrógeno), se consideran apolares.

¿Por qué el aceite y el agua no se mezclan?



FUERZAS INTERMOLECULARES

Son fuerzas de atracción que existen entre las moléculas de una sustancia. Son mucho más débiles que los enlaces interatómicos y son las responsables de la existencia de los estados condensados de la materia (líquidos y sólidos); son fuerzas de cohesión acumulativas con naturaleza electrostática.

	Para disociar un mol de moléculas de agua se necesita un total de 920 kJ de energía.
	Para vaporizar un mol de moléculas de agua se necesita un total de 41 kJ de energía.

Conclusión:

Magnitud Fuerzas Intermoleculares < **Magnitud Enlaces Químicos**

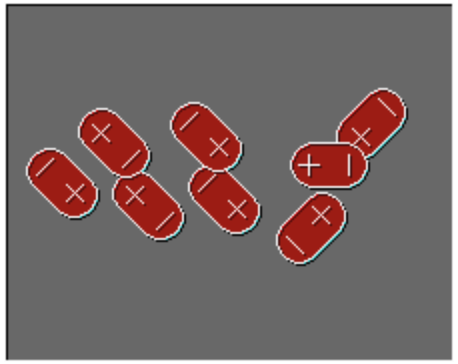
FUERZAS INTERMOLECULARES

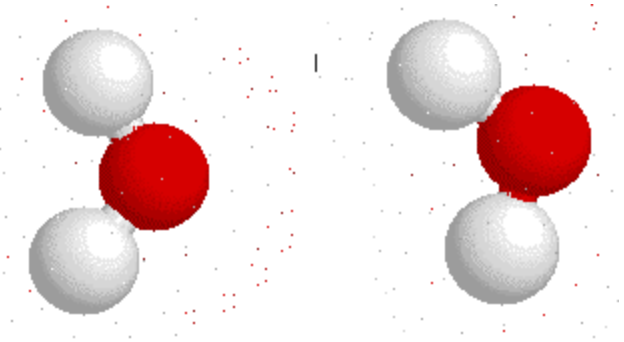
Las fuerzas intermoleculares son responsables del comportamiento físico de las sustancias, tales como: los estados de agregación, los puntos de fusión y ebullición, la capacidad de los gases para licuarse, la solubilidad en determinados solventes, etc.

Las fuerzas intermoleculares se pueden clasificar en:

FUERZAS INTERMOLECULARES

- DIPOLO - DIPOLO
- FUERZAS DE DISPERSIÓN O FUERZAS DE LONDON
- PUENTE DE HIDRÓGENO





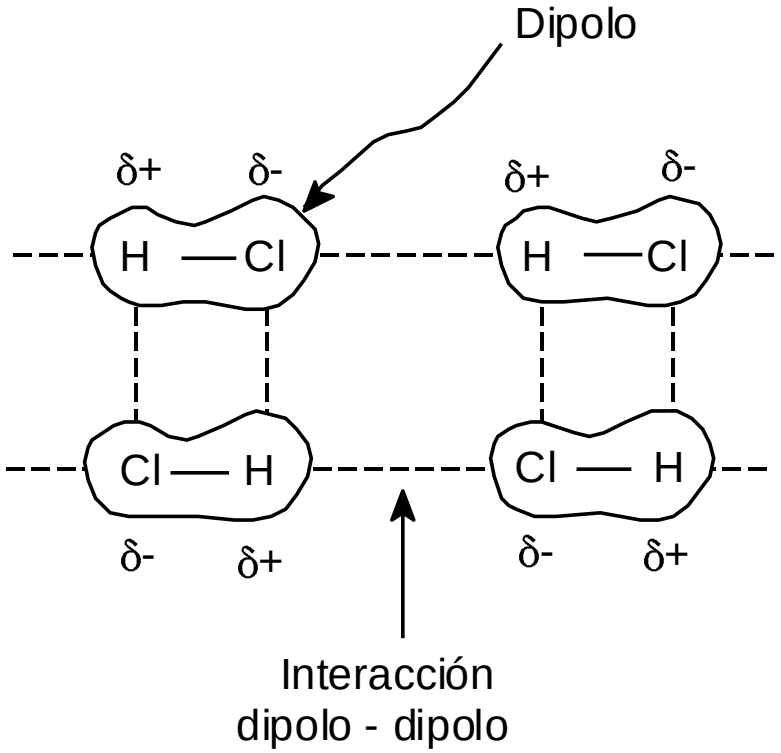
FUERZAS INTERMOLECULARES

FUERZAS DE VAN DER WAALS

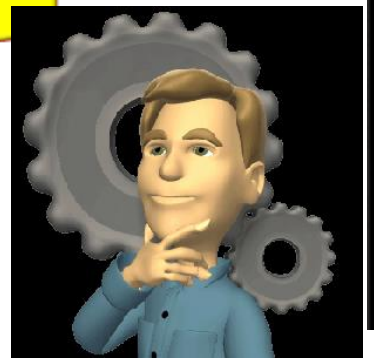
I. INTERACCIONES DIPOLO - DIPOLO : (Fuerzas de Keesom)

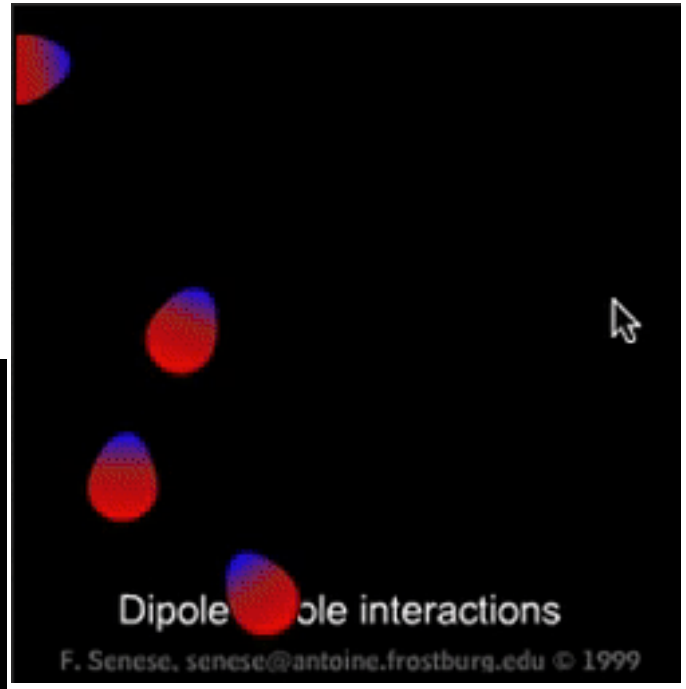
Las interacciones (fuerzas) dipolo - dipolo permanentes tienen lugar entre moléculas polares y tienen un origen electrostático. Las moléculas polares generan dipolos permanentes, los cuales pueden interactuar entre sí cuando se encuentran sus polos opuestos.

Ejemplo : Moléculas de Cloruro de Hidrógeno (HCl)



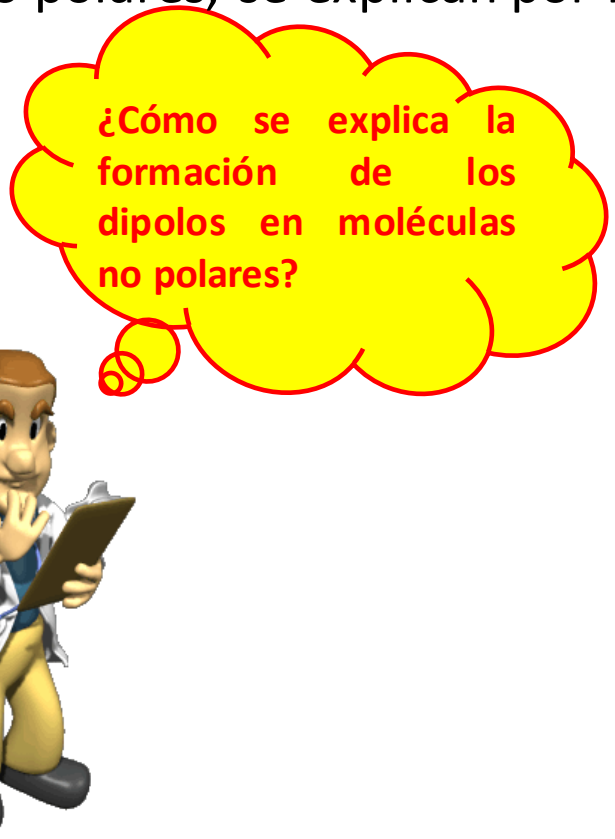
A MAYOR POLARIDAD DE LA MOLÉCULA, LA INTERACCIÓN DIPOLO-DIPOLO ES MAS INTENSA



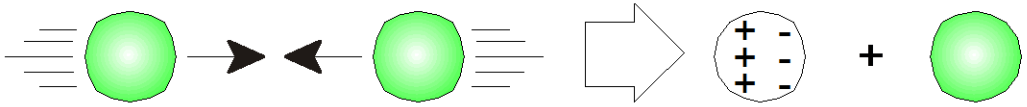


II. FUERZAS DE DISPERSIÓN DE LONDON :

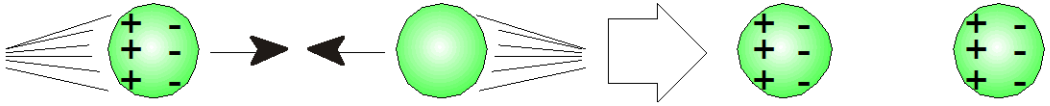
Las fuerzas de London son fuerzas atractivas débiles que son importantes sólo a distancias intermoleculares pequeñas (fuerzas de "corto alcance"). **Las fuerzas de London son únicas o exclusivas en las sustancias no polares** como por ejemplo $CO_{2(s)}$, $O_{2(l)}$, $P_{4(s)}$. Los estados condensados sólido y líquido de los gases nobles y de las sustancias constituidas por moléculas no polares, se explican por la existencia de estas fuerzas de dispersión.



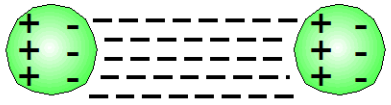
1. La colisión de moléculas genera un dipolo temporal



2. El dipolo temporal genera un dipolo inducido



3. Interacción dipolo temporal - dipolo inducido



Fuerzas de dispersión de London

FUERZAS INTERMOLECULARES

Observaciones:

1°) Las fuerzas de dispersión son más intensas en moléculas no polares grandes que en las pequeñas, esto se debe a la mayor superficie de contacto, esto motiva a una mayor atracción entre las moléculas, por ejemplo la atracción entre el I_2 es más intensa que el Br_2 y ésta es más intensa que el F_2.

2°) Las fuerzas de London son las causantes de que los gases puedan licuarse, es decir que se mantengan unidas en fase líquida.

3°) Las fuerzas de London están presentes en todas las interacciones moleculares.

4°) Si bien es cierto que las fuerzas de London son débiles, existen casos en donde su magnitud es comparable o aun mayores que las dipolo - dipolo; así por ejemplo :

Molécula	μ_{exp}	$T°_{fusión}$
CH_3F	1,8 D	131 K
CCl_4	0 D	250 K

Aunque el término "fuerzas de Van der Walls" normalmente se refieren a todas las atracciones intermoleculares, también se intercambia a menudo con el término "fuerzas de London", como lo hacen los términos "fuerzas de dispersión" y "fuerzas dipolo - dipolo inducido".

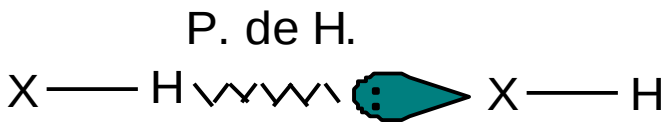
FUERZAS INTERMOLECULARES

PUENTE DE HIDRÓGENO :

Los llamados “puentes de hidrógeno” son un caso especial de las fuerzas dipolo - dipolo, muy fuertes. Cuando en la molécula existen átomos de hidrógeno unidos a átomos pequeños y fuertemente E.N., como son el “F”, “O” y “N”, se produce una fuerte polarización del enlace quedando el hidrógeno con polaridad positiva y fuertemente atraído por el átomo muy E.N. (F; O; N), de otra molécula vecina. El puente de hidrógeno es el responsable de los puntos de ebullición inusualmente altos de ciertas sustancias frente a otras de masa molecular y geometría similar.

En términos comparativos, la intensidad de esta fuerza es aproximadamente un 5% de la intensidad de un enlace covalente.

Esquemáticamente se representa así:

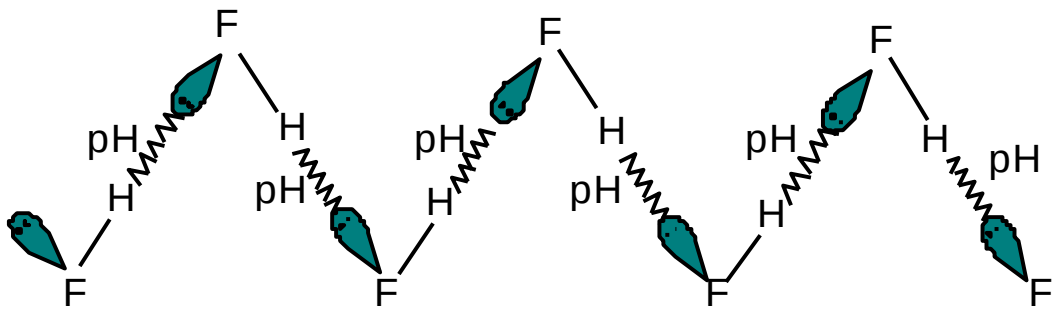


Donde : “X” es Flúor, Oxígeno ó Nitrógeno

FUERZAS INTERMOLECULARES

Ejemplo 1 : Dimerización del fluoruro de hidrógeno (HF)

En el fluoruro de hidrógeno sólido las moléculas no existen como unidades individuales, en lugar de esto forman grandes cadenas en zigzag según:

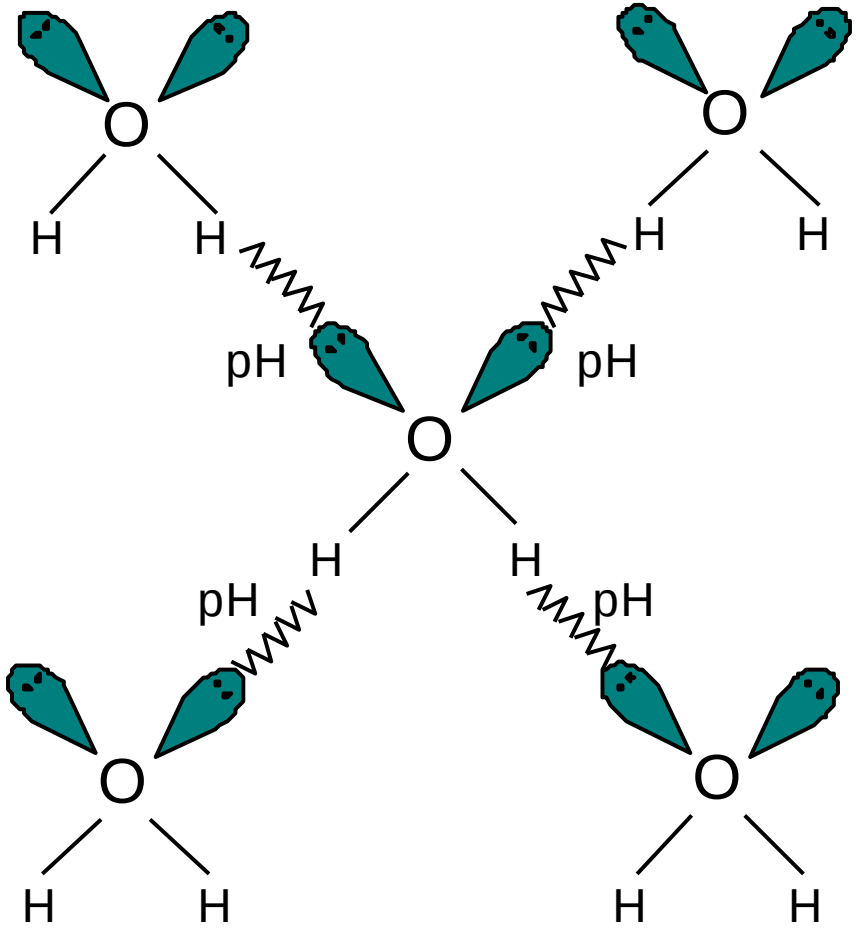


*** El dímero del HF es H_2F_2**

En la fase líquida las cadenas en zig - zag se rompen pero las moléculas todavía están unidas entre sí por puentes de hidrógeno, como es difícil separar las moléculas que están unidas por puentes de hidrógeno, el HF líquido tiene un punto de ebullición excepcionalmente alto (T_{eb} = 19,6 °C).

FUERZAS INTERMOLECULARES

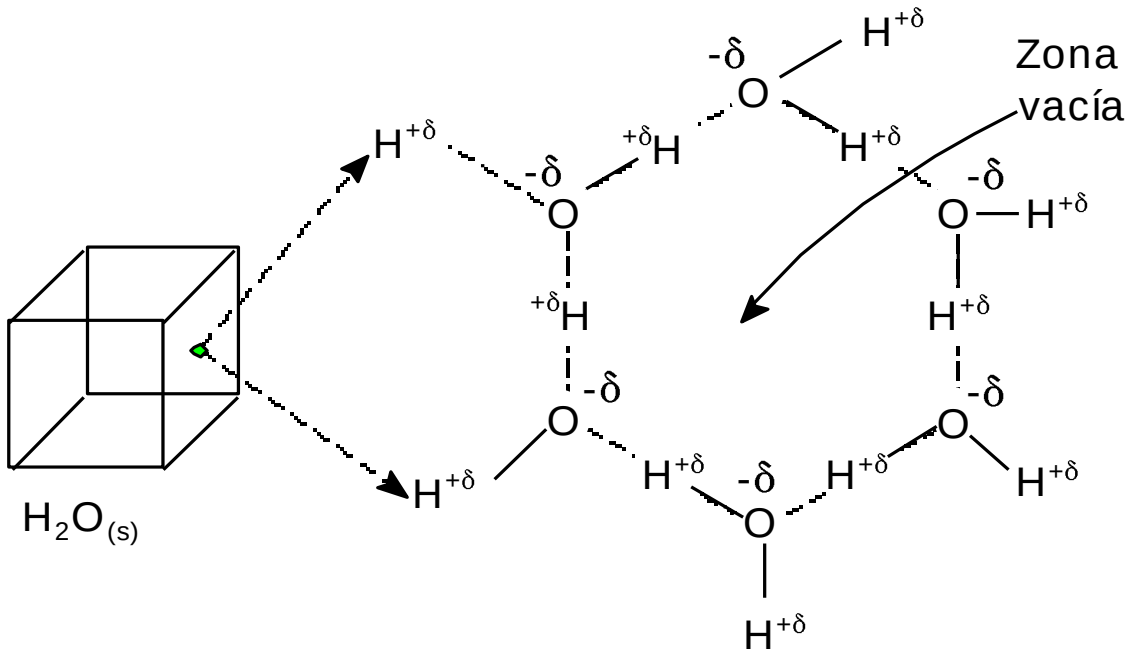
Ejemplo 2 : Para el H_2O

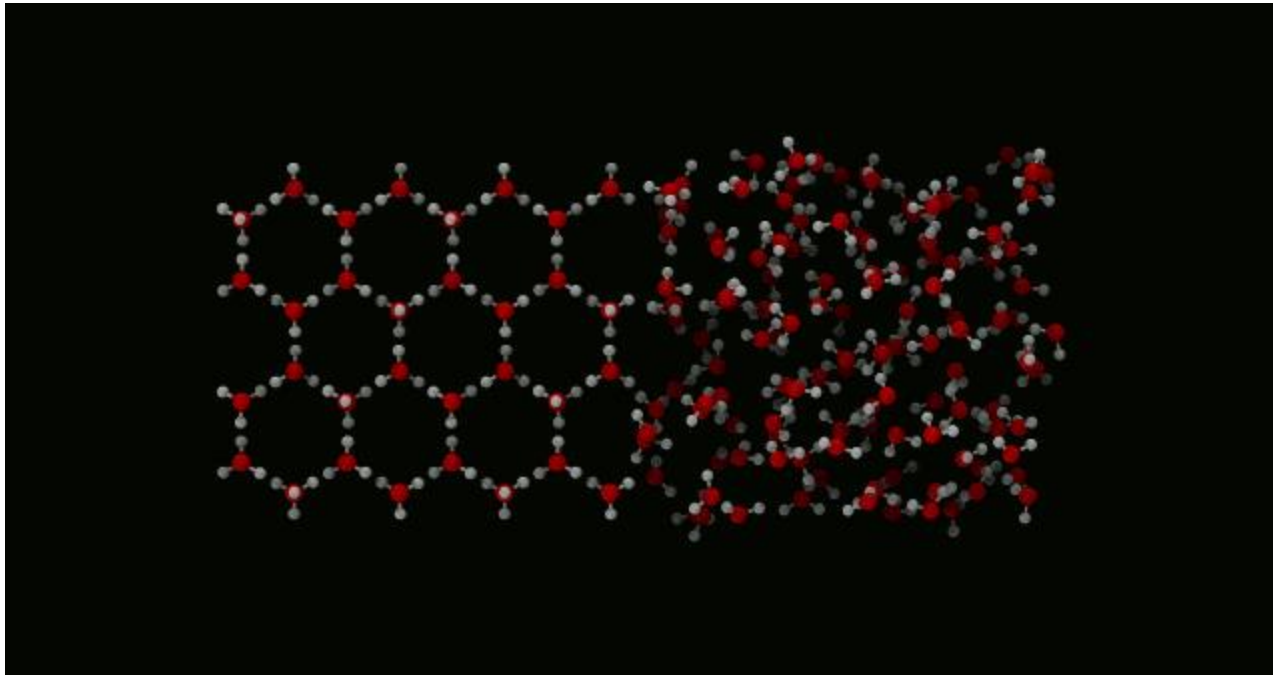


Cada molécula de agua genera cuatro "puentes de hidrógeno" con las moléculas adyacentes.

FUERZAS INTERMOLECULARES

En la molécula de H_2O sólida:





A medida que las moléculas del agua líquida se van solidificando se genera una "zona hueca" formando una estructura hexagonal con un espacio central vacío, lo que explica la expansión volumétrica (aumenta el volumen). Debido a esto, la densidad disminuye, lo que explica porque el hielo (agua sólida) flota en el agua líquida.

$$\underbrace{\rho_{hielo}}_{0{,}95\ g/mL} < \underbrace{\rho_{H_2O}}_{1\ g/mL}$$

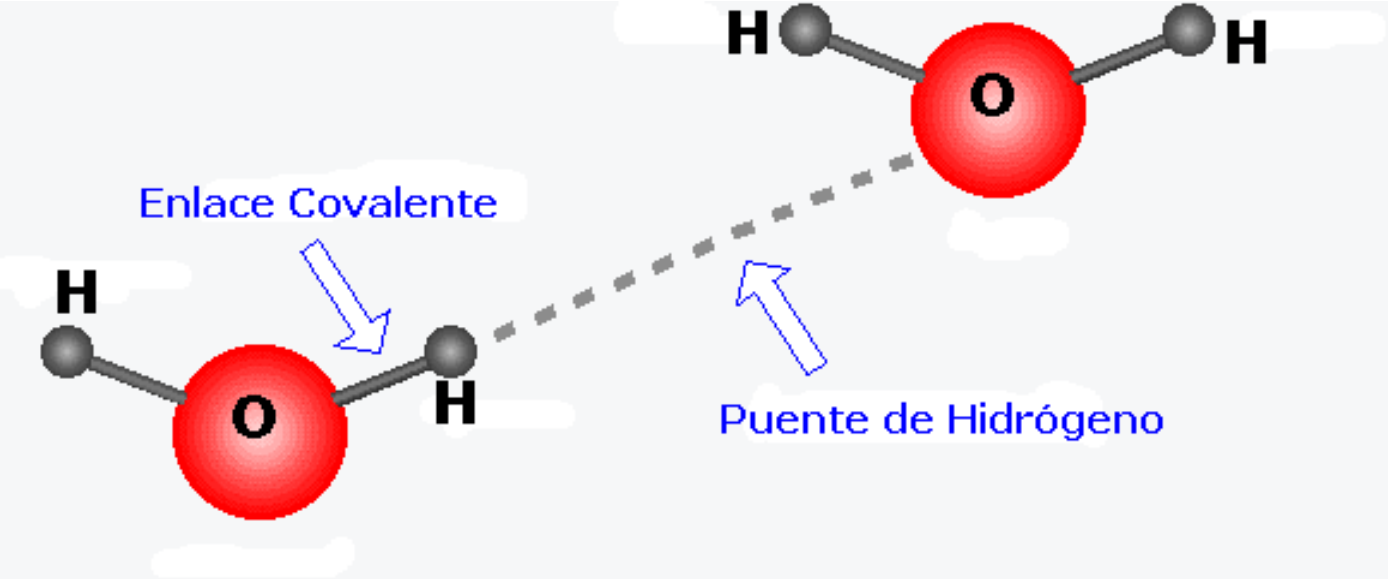
FUERZAS INTERMOLECULARES

Observaciones:

1°) Los compuestos **líquidos que presentan puente hidrógeno** reciben el nombre de **"líquidos asociados"**.

2°) Las especies orgánicas como los ácidos carboxílicos R - COOH y los alcoholes R - OH forman puentes de hidrógeno.

3°) La energía promedio de un puente de hidrógeno (más de 40 $kJ.mol^{-1}$) es demasiado grande para una interacción dipolo - dipolo simple (4 $kJ.mol^{-1}$), así que los puentes de hidrógeno tienen un poderoso efecto en la estructura y propiedades de muchos compuestos.



FUERZAS INTERMOLECULARES

01. Indique la proposición incorrecta:

I. La hibridación es la mezcla de orbitales puros de diferentes energías y átomos, para obtener orbitales de energías equivalentes

II. El átomo de hidrógeno, siempre está hibridizado al formar compuestos

III. La hibridación justifica la formación de enlaces

A) Sólo I B) Sólo II C) Sólo III

D) I y II E) II y III

I. **(FALSO)**

La hibridación es la mezcla de orbitales puros de diferentes energías y átomos, para obtener orbitales de energías equivalentes

II. **(FALSO)**

El átomo de hidrógeno, siempre está hibridizado al formar compuestos

III. **(VERDADERO)**

La hibridación justifica la formación de enlaces

FUERZAS INTERMOLECULARES

02. Determine el tipo de hibridación del átomo central en los siguientes compuestos respectivamente:

$HClO_2$ CO_2 BF_3

A) sp^3, sp, sp

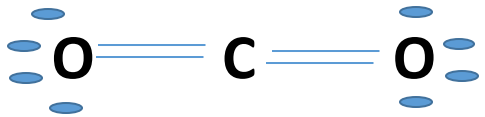
B) sp^2, sp, sp^3

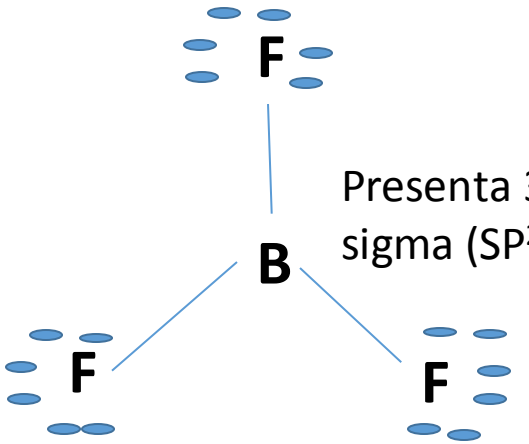
C) sp, sp^2, sp^3

D) sp, sp^3, sp^2

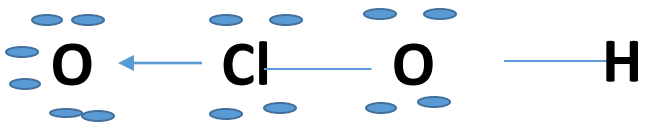
E) sp^3, sp, sp^2

Presenta 2 enlaces sigma (SP)





Presenta 3 enlaces sigma (SP^2)



Presenta 2 enlaces sigma y dos pares e libres (SP^3)

FUERZAS INTERMOLECULARES

03. Respecto a la hibridación de orbitales señale las proposiciones correctas:

I. Los orbitales del Be en el $BeCl_2$ son dilobulares.

II. Los orbitales del B en el BCl_3 son del tipo sp3

III. Los orbitales sp2 forman ángulos de 120° entre sí

A) Sólo I B) Sólo III C) I y II

D) II y III E) I y III

I. (FALSO)

Los orbitales del Be en el $BeCl_2$ son dilobulares. (el Be tiene orbitales híbridos sp)

II. **(FALSO)**

Los orbitales del B en el BCl_3 son del tipo sp3 (el B tiene orbitales híbridos sp^2)

III. **(VERDADERO)**

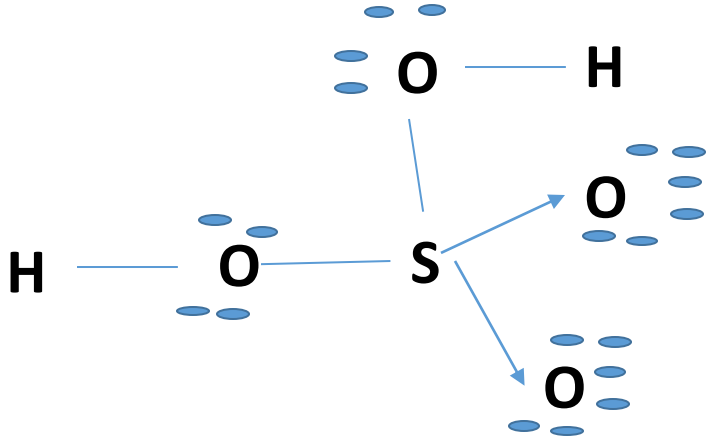
Los orbitales sp2 forman ángulos de 120° entre sí (se tiene tres orbitales hibridos que se orientan a los vértices de un triangulo plano sp^2)

FUERZAS INTERMOLECULARES

04. Indique verdadero (V) o falso (F) según la correspondencia entre fórmula - tipo de geometría

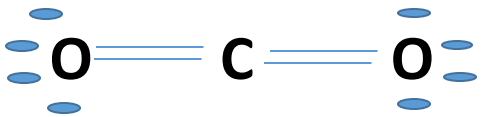
I. H_2SO_4 - plana trigonal
II. SO_2 - angular
III. CO_2 - lineal

A) VVV B) VFF **C) FVV**
D) FVF E) FFF

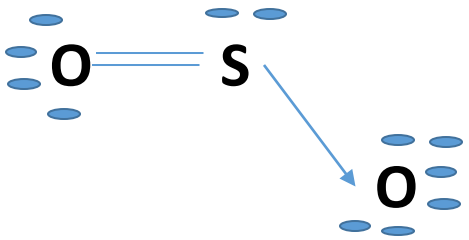


Geometría tetraedrica

Geometría lineal



Geometría angular



FUERZAS INTERMOLECULARES

05. Determine la geometría molecular de las siguientes moléculas respectivamente:

HNO_3 CO BF_3

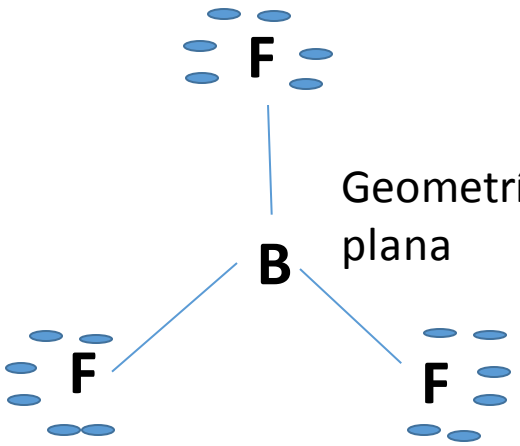
A) Planar, angular, lineal

B) Lineal, lineal, planar

C) Angular, lineal, tetraedral

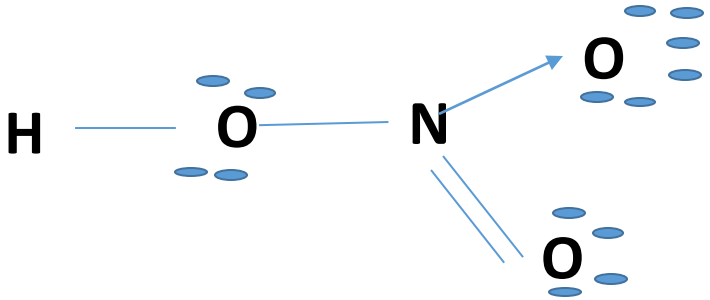
D) Angular, planar, tetraedral

E) Planar, lineal, planar



Geometría trigonal plana

Geometría lineal



Geometría trigonal plana

FUERZAS INTERMOLECULARES

06. Suponiendo que el momento dipolar del enlace solo depende de la electronegatividad, ordene en forma creciente al momento dipolar de los siguientes enlaces:

Br - Cl ; F - F ; H - F ; I - F ; Br - F

A) F - F < H - F < Br - Cl < I - F < Br - F

B) F - F < Br - F < Br - Cl < I - F < H - F

C) F - F < Br - Cl < Br - F < I- F < H - F

D) F - F < I - F < Br - F < Br - Cl < H - F

E) F - F < Br - F < H - F < Br - Cl < I - F

$\Delta E.N. =$ F - F =0

$\Delta E.N. =$ H - F =1,9

$\Delta E.N. =$ Br - Cl =0,2

$\Delta E.N. =$ I - F =1,5

$\Delta E.N. =$ Br - F =1,2

FUERZAS INTERMOLECULARES

07. ¿Qué enlace posee mayor momento dipolar?

A) H - S B) H - Se C) H - Te
D) H - H E) H - O

08. Determine la polaridad molecular de los siguientes compuestos:

H_2O SO_2 CH_3Cl

A) Polar, apolar, apolar
B) Polar, polar, apolar
C) Apolar, polar, apolar
D) Apolar, apolar, polar
E) Polar, polar, polar

H_2O : molécula polar (atomo central tiene pares de electrones libres)

SO_2 : molécula polar (atomo central tiene pares de electrones libres)

CH_3Cl: molécula polar (atomo central tiene pares de electrones enlazados pero tiene un atomo externo distinto)

FUERZAS INTERMOLECULARES

09. Indique cuantas de las moléculas son polares:

BCl_3 molecula apolar

CCl_4 molecula apolar

BeF_2 molecula apolar

SO_2 molecula polar (atomo central tiene pares de e libres)

NH_3 molecula polar (atomo central tiene pares de e libres)

A) 0 B) 1 C) 2

D) 3 E) 4

FUERZAS INTERMOLECULARES

10. Respecto al "puente de hidrógeno":

I. Son fuerzas intermoleculares

II. Se presentan entre moléculas apolares

III. Se presentan entre dipolos instantáneos

Son correctas:

A) Sólo I B) Sólo II C) Sólo III

D) I y II E) I, II y III

10. Respecto al "puente de hidrógeno":

I. VERDADERO

Son fuerzas intermoleculares

II. FALSO

Se presentan entre moléculas apolares

III. FALSO

Se presentan entre dipolos instantáneos

Son correctas:

FIN DE LA SESIÓN

PRACTICA Y APRENDERÁS